

# 高场核磁共振中心三台核磁谱仪的主要功能

## 1. AC 850M 谱仪

- (1) 超低温 TCI 探头 ( $^1\text{H}/^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$  三共振反向检测), 对  $^1\text{H}$  和  $^{13}\text{C}$  均有很高的灵敏度, 主要用于开展蛋白质或多肽等样品的结构生物学 (溶液结构, 蛋白质-配体相互作用, 动力学, 药物筛选等) 和生物样品 (血清, 血浆, 尿液, 组织或细胞或植物萃取液等) 的代谢组学研究, 发现和确认新药靶, 也可以检测微量或低浓度或复杂结构的化合物或杂质, 进行化学结构鉴定和理化性质表征, 等等。
- (2) 常温 TXI 探头 ( $^1\text{H}/^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$  三共振反向检测), 对  $^1\text{H}$  有高的灵敏度, 主要用于开展蛋白质或多肽等样品的结构生物学 (溶液结构, 蛋白质-配体相互作用, 动力学, 药物筛选等) 和生物样品 (血清, 血浆, 尿液, 组织或细胞或植物萃取液等) 的代谢组学研究, 发现和确认新药靶, 也可以检测复杂结构的化合物, 进行化学结构鉴定和理化性质表征, 等等。

## 2. AC 600M 谱仪

- (1) 超低温 BBFO 探头 ( $^1\text{H}/^{19}\text{F}, ^{31}\text{P}-^{15}\text{N}$  宽带多核正向检测), 对  $^1\text{H}$  和  $^{13}\text{C}$  等杂核均有很高的灵敏度, 主要用于检测低浓度的化合物或杂质, 进行化学结构鉴定和理化性质表征, 等等。
- (2) 常温 BBFO 探头 ( $^1\text{H}/^{19}\text{F}, ^{31}\text{P}-^{109}\text{Ag}$  宽带多核正向检测), 对  $^{13}\text{C}$  等杂核均有高的灵敏度, 主要用于检测化合物, 进行化学结构鉴定和理化性质表征。
- (3) 常温 TXI 探头 ( $^1\text{H}/^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$  三共振反向检测), 对  $^1\text{H}$  有高的灵敏度, 主要用于开展蛋白质或多肽等样品的结构生物学 (溶液结构, 蛋白质-配体相互作用, 动力学, 药物筛选等) 和生物样品 (血清, 血浆, 尿液, 组织或细胞或植物萃取液等) 的代谢组学研究, 发现和确认新药靶, 也可以检测化合物, 进行化学结构鉴定和理化性质表征, 等等。

## 3. AC 500M 谱仪

- (1) 常温 BBFO 探头 ( $^1\text{H}/^{19}\text{F}, ^{31}\text{P}-^{109}\text{Ag}$  宽带多核正向检测), 对  $^{13}\text{C}$  等杂核有高的灵敏度, 主要用于检测化合物, 进行化学结构鉴定和理化性质表征, 等等。
- (2) 常温 TXI 探头 ( $^1\text{H}/^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$  三共振反向检测), 对  $^1\text{H}$  有高的灵敏度, 主要用于开展蛋白质和核酸等样品的结构生物学 (溶液结构, 蛋白质或核酸-配体相互作用, 动力学等) 和生物样品 (血清, 血浆, 尿液, 组织或细胞或植物萃取液等) 的代谢组学研究, 等等。
- (3) 常温高分辨率的魔角旋转微量 HRMAS 探头 ( $^1\text{H}/^{13}\text{C}$  双共振反向检测,  $^1\text{H}$  优化), 对  $^1\text{H}$  有较高的灵敏度, 主要用于检测微量化合物, 进行化学结构鉴定和理化性质表征。可以使用 12  $\mu\text{L}$  转子 (液体) 和 50  $\mu\text{L}$  转子 (组织, 细胞, 高聚物, 半固体等样品)。
- (4) 常温高分辨率的魔角旋转微量 HRMAS 探头 ( $^1\text{H}/^{13}\text{C}$  双共振正向检测,  $^{13}\text{C}$  优化), 对

$^{13}\text{C}$  具有较高的灵敏度，主要用于检测微量化合物，进行化学结构鉴定和理化性质表征。可以使用 12 uL 转子（液体）和 50 uL 转子（组织，细胞，高聚物，半固体等样品）。

#### 4. LC-MS/NMR 联用系统

- (1) 该联用系统为 AC 600M 谱仪和 AC 850M 谱仪公用。
- (2) LC 为 Agilent 1200 quaternary HPLC 色谱仪, MS 为 ESI-Q-TOF (电喷雾-四级杆飞行时间串联质谱仪)。
- (3) 由 LC 分离出的组分 5% 进入质谱仪进行分析, 95% 进入核磁谱仪 (超低温探头) 进行分析 (配置了 SPE 固相萃取与转移装置)。
- (4) 可以对混合物 (天然产物, 生物体液, 组织或细胞或植物萃取液, 中药材等) 同步进行色谱分离、质谱分析和核磁分析。
- (5) 配备了 Gilson 自动进样器 (96 孔), 可以开展高通量、快速的药物筛选 (活性化合物, 药物有效成分等) 和代谢组学分析, 等等。

下图为三台核磁谱仪的基本配置与主要功能

